Ferdowsi University of Mashhad

Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics

Page Journal: mechanic-ferdowsi.um.ac.ir

Society of Manufacturing Engineering of Iran

Analysis of the Fracture Behavior of Polycrystalline Carbon Nitride by Genetic Algorithm and Molecular Dynamics Methods

Research Article

Mehdi Beynaghi[1], Saeed Rahnama[2,*], Ali Dadrasi[3]

DOI:10.22067/jacsm.2023.83323.1192

1- Introduction

Two-dimensional (2D) materials have been extensively developed and used in the last two decades. The 2D graphene single layers isolated from graphite by Geim and Novoselov in the mid-2000s onwards have later progressed to hexagonal boron nitride for graphene electronics. The introduction of these materials in various industries, such as electronics, optoelectronics, aerospace, drug delivery, and sensors, has been expanding at an increasing speed. Zero band-gap of graphene in some cases is considered a drawback in some industries. Therefore, graphene modification by substituting the atoms of nitrogen and boron is considered a suitable approach for making 2D heterogeneous graphite materials. C_3N is a graphene-like 2D material with a honeycomb atomic structure consisting of carbon and nitrogen atoms covalently bonded to each other (Fig. 1). In this structure, each nitrogen atom is surrounded by three carbon atoms. The uniform distribution of nitrogen atoms in this structure and the similar atomic radius of carbon and nitrogen have made the structure of carbon nitride unique among other 2D materials. Although the structural shape of C_3N is hexagonal and honeycomb and can be placed without obstacles, in the real world, the presence of holes and defects in these materials causes them to impact distinct properties. Cracks and grain boundaries have been introduced as one of the most important defects in these structures, which are inevitable. These geometrical defects created under external loading cause in-plane and out-of-plane geometric deformation and affect the various properties of these structures.

In this article, C_3N monocrystalline and polycrystalline were studied using the molecular dynamics simulation method. First, we investigated C_3N monocrystalline at different temperatures and in two directions armchair and zigzag loading. In the next step, considering five types of C_3N polycrystalline at diverse temperatures, the mechanical properties of Young's modulus, failure stress, and strain were examined. For each type of these areas, four different modes were considered. Next, the effect of crack length was analyzed. Finally, the optimal values of Young's modulus are reported using the genetic algorithm method.

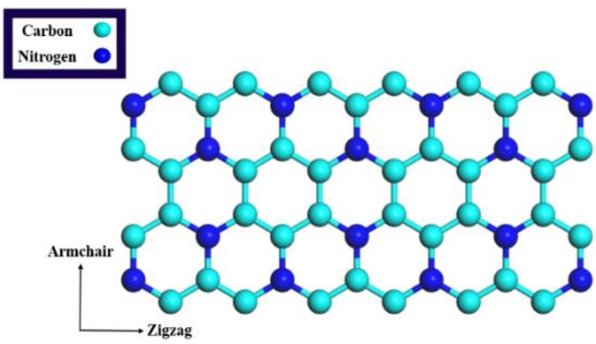


Fig. 1. Basic model of C_3N honeycomb structure

2- Computational Method

In this study, molecular dynamics simulation was used to model and analyze the mechanical properties of Young's modulus, fracture stress, and strain of C_3N nanosheets. The results obtained from molecular dynamics are affected by the accuracy of the functions used to implement atomic interactions and loading conditions. Consequently, Tersoff potential was used to express and describe C-C and C-N interatomic interactions. Moreover, OVITO software was utilized to visualize and monitor the examined outputs and positioning of atoms. The two loading directions of the zigzag and armchair represent the X and Y directions, respectively. The mechanical properties of Young's modulus, fracture stress, and strain of two-dimensional C_3N structures with the length and width of 10×10 nm^2 in

*Manuscript received: July 13, 2023. Revised, August 23, 2023, Accepted, November 12, 2023.

[1]. PhD Student, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran.

[2] Corresponding author. Associate Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran. **Email**: srahnama@birjand.ac.ir

[3]. Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran.

both armchair and zigzag directions were investigated in the temperature range of 100-900 K. The slope of the linear part of each graph is used to calculate Young's modulus. The mechanical properties of the polycrystalline structures with the region numbers 5, 16, 24, 32, and 53 were studied. These models were examined by randomly distributing areas with four different modes in the simulation box. The regions are connected by grain boundaries in different states (Fig. 2). In addition, three crack lengths of 5, 12, and 25 A were studied as edge cracks.

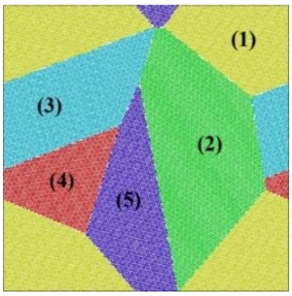


Figure 2. Structure of C_3N polycrystalline with five regions

3- Results and Discussion

Mechanical properties of C_3N monocrystalline

The results show that the mechanical properties in the zigzag direction are higher than in the armchair direction. In addition, the mechanical properties in both directions decrease significantly with increasing temperature. The highest values of the Young's modulus, failure stress, and strain for C_3N monocrystalline were obtained at the lowest temperature and in the zigzag direction, which were equal to 908.67 GPa, 306.11 GPa, and 0.432%, respectively.

Mechanical properties of C_3N polycrystalline with different number of regions. The average values of Young's modulus of C_3N polycrystalline as a function of the number of regions and at a temperature of 300 K are shown in Fig. 3. According to this figure, as the number of regions increases, the value of Young's modulus decreases. The comparison of the results obtained from the monocrystalline and polycrystalline shows that the reported values of the monocrystalline type in both armchair and zigzag directions are higher than the polycrystalline structures.

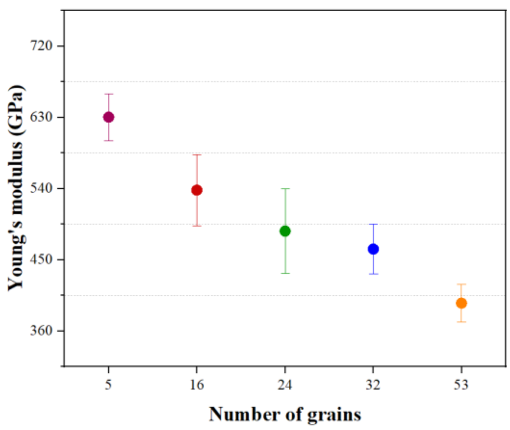


Fig. 3. Young's modulus of C_3N polycrystalline as a function of the region's number

The effect of crack length and temperature. The fracture stress for the structure without cracks and at a temperature of 900 K is almost one-third of the stress at a temperature of 100 K (38.76 GPa compared to 106.82 GPa). In addition, the fracture stress for the structure with a crack length of 25 A was found to be nearly 24% and 25% lower than the structure without cracks at temperatures of 100 and 900 K, respectively.

Optimization. In this section, the genetic algorithm method is used to achieve the optimal value of Young's modulus. According to the results obtained in the previous sections, the optimal value of Young's modulus for the C_3N polycrystalline structure with 53 regions and random arrangement number 3 was studied. Fig. 4 shows the 3D diagram of changes in Young's modulus according to two variables: temperature and crack length. The optimal value of Young's modulus was obtained at a temperature of 586.95 K and a crack length of 6.52 A, and its value was equal to 338.18 GPa.

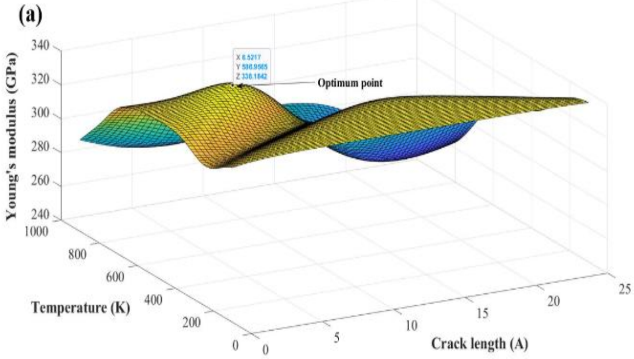


Fig. 4. 3D diagram of Young's modulus in terms of temperature and crack length

4- Conclusion

In this article, the fracture behavior of C_3N nanoplates in both monocrystalline and polycrystalline states was investigated. For this purpose, molecular dynamics simulation was utilized applying appropriate potential function and proper boundary conditions. The results showed that the mechanical properties of C_3N monocrystalline decreased with increasing temperature from 100 K to 900 K regardless of the loading direction. It is worth mentioning that the mechanical properties of C_3N nanosheets in the zigzag direction were reported to be higher than in the armchair direction. The maximum value of Young's modulus was obtained at the temperature of 100 K, which was equal to 908.67 GPa and in the zigzag direction. On the other hand, the results showed that increasing the number of regions in polycrystalline structures caused a decrease in the mechanical properties. The Young's modulus for a crack length of 25 A declined from 331.97 GPa at 100 K to 219.48 GPa at 900 K. Finally, the optimization of the Young's modulus of C_3N polycrystalline with 53 regions and random arrangement number 3 was reported 338.18 GPa at a temperature of 586.95 K and crack length of 52.6 A.

علوم کاربردی و محاسباتی در مکانیک

http://mechanic-ferdowsi.um.ac.ir

تحلیل رفتار شکست پلی‌کریستال نیترید کربن به روش‌های الگوریتم ژنتیک و دینامیک مولکولی*

مقاله پژوهشی

مهدی بینقی[۱] سعید رهنما[۲] علی دادرسی[۳]

DOI: 10.22067/jacsm.2023.83323.1192

چکیده تمرکز تنش و کمانش غیرخطی ناشی از مرزدانه‌ها در ساختارهای دو بعدی و عیوب هندسی به عنوان عوامل اثرگذار بر رفتار شکست مواد دو بعدی معرفی می‌شوند. از آنجایی که رفتار مکانیکی نانوساختارهای پلی‌کریستال به خوبی شناخته نشده است، در این مقاله، بررسی رفتار مکانیکی نانوصفحات نیترید کربن به عنوان تابعی از دما و مرزدانه مورد مطالعه قرار گرفت. عملکرد مکانیکی پلی‌کریستال نیترید کربن در حضور و عدم حضور ترک لبه‌ای و در دماهای ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین مورد آزمایش قرار گرفت. از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به عنوان یک روش مقرون به صرفه برای مدل‌سازی و آزمایش صفحات دو بعدی با انتخاب تابع پتانسیل مناسب و شرایط مرزی استفاده شد. نتایج نشان داد که خواص مکانیکی مونوکریستال نیترید کربن با افزایش دما کاهش می‌یابد و نتایج در راستای زیگزاگ بالاتر از آرمچیر گزارش شد. همین روند برای ساختار پلی‌کریستال نیز مشاهده شد که با افزایش دما، مدول یانگ، تنش و کرنش شکست کاهش می‌یابد. همچنین، افزایش طول ترک از ۵ به ۲۵ آنگستروم نیز سبب کاهش خواص مکانیکی شد. از سویی دیگر، افزایش تعداد ناحیه برای پلی‌کریستال نیترید کربن موجب کاهش تنش شکست گردید. علاوه بر این، بهینه‌سازی به روش الگوریتم ژنتیک صورت پذیرفت و نتایج نشان داد که مقدار بهینه مدول یانگ برای پلی‌کریستال نیترید کربن با ۵۳ ناحیه در دمای ۵۸۶/۹۵ کلوین و طول ترک ۶/۵۲ آنگستروم، معادل ۳۳۸/۱۸ گیگاپاسکال است. نتایج به دست آمده از این مطالعه را می‌توان به موارد پیچیده‌تر تعمیم داد تا درک عمیق‌تری از نسل‌های بعدی ساختارهای دو بعدی را پیش‌بینی نماید.

واژه‌های کلیدی شبیه‌سازی، الگوریتم ژنتیک، دینامیک مولکولی، پلی‌کریستال، نیترید کربن.

Analysis of the Fracture Behavior of Polycrystalline Carbon Nitride by Genetic Algorithm and Molecular Dynamics Methods

Mehdi Beynaghi Saeed Rahnama Ali Dadrasi

Abstract *Stress concentration and nonlinear buckling caused by grain boundaries in two-dimensional structures and geometric defects are introduced as factors affecting the fracture behavior of two-dimensional materials. Since the mechanical behavior of polycrystalline nanostructures is not well known, in this article, the mechanical behavior of carbon nitride nanosheets was studied as a function of temperature and grain boundaries. The mechanical performance of polycrystalline carbon nitride was tested in the presence and absence of edge cracks and at temperatures from 100 K to 900 K. Molecular dynamics simulation was used as a cost-effective method for modeling and testing two-dimensional nanosheets by choosing the appropriate potential function and boundary conditions. The results showed that the mechanical properties of carbon nitride monocrystalline decrease with increasing temperature and the results were reported in zigzag direction higher than armchair. The same trend was observed for the polycrystalline structures. The increase in temperature caused the Young's modulus, failure stress and strain to decrease. Also, increasing the crack length from 5 to 25 angstroms caused a decrease in mechanical properties. On the other hand, increasing the number of regions for carbon nitride polycrystalline decreased the failure stress. In addition, the optimization was carried out by genetic algorithm and the results showed that the optimal value of Young's modulus for carbon nitride polycrystalline with 53 regions at a temperature of 586.95 K and a crack length of 6.52 angstroms is equivalent to 338.18 GPa. The results obtained from this study can be generalized to more complex cases to predict a deeper understanding of the next generations of two-dimensional structures.*

Key Words: Simulation, Genetic algorithm, Molecular dynamics, Polycrystalline, Carbon nitride.

* تاریخ دریافت مقاله ۱۴۰۲/۴/۲۲ و تاریخ پذیرش آن ۱۴۰۲/۸/۲۱ می‌باشد.

(۱) دانشجوی دکتری، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه بیرجند، بیرجند، ایران.

(۲) نویسنده مسئول: دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه بیرجند، بیرجند، ایران.

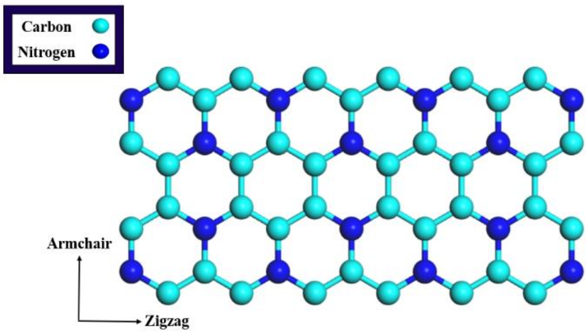
Email: srahnama@birjand.ac.ir

(۳) استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، ایران.

مقدمه

در دو دهه اخیر مواد دو بعدی به طور گسترده توسعه یافته و مورد استفاده قرار گرفته است. در اواسط سال ۲۰۰۰ تک لایه‌های گرافن دو بعدی توسط Geim به ساختار شش ضلعی نیترید برای الکترونیک گرافن تبدیل شد [1]. علاقه به مواد کربنی دو بعدی همان طور که در گزارش‌های متعدد به آن‌ها اشاره شده است، بر روی خواص حرارتی، مکانیکی، نوری و الکترونیکی به طور مداوم در دهه گذشته افزایش یافته است. از همین رو، ورود این مواد در صنایع مختلف همچون الکترونیک، اپتوالکترونیک، هوافضا، دارورسانی و حسگرها با سرعت روزافزونی گسترش یافته است [2,3]. در این میان، طراحی و توسعه انواع دیگر مواد دو بعدی نیز رشد چشم‌گیری را تجربه کرده‌اند. از این میان، می‌توان به موادی همچون AlN (Aluminum nitride)، ZnO (Zinc oxide)، GaN (Gallium nitride)، BeO (Beryllium oxide) و TiO_2 (Titanium dioxide) اشاره کرد [4-6]. از آنجایی که فاصله باند صفر گرافن در برخی موارد به عنوان یک اشکال در بعضی صنایع محسوب می‌گردد، اصلاح گرافن با جایگزینی اتم‌هایی همچون نیتروژن و بور به عنوان یک رویکرد مناسب برای ساخت مواد دو بعدی گرافیتی ناهمگن محسوب می‌شود [7].

با استفاده از این رویکرد، می‌توان با تغییرات و تنظیم برخی پارامترها مانند عناصر مورد استفاده به عنوان اصلاح کننده، به نسل جدیدی از این مواد دست یافت. با توجه به تحقیقات صورت گرفته، ساختارهایی مانند C_3N (Carbon nitride)، BC_3 (Boron carbide)، BCN (Boron carbon nitride) و BN (Boron nitride) اگرچه ساختار مشابهی نسبت به گرافن دارند، اما خواص شیمیایی و فیزیکی متفاوتی را از خود نشان داده‌اند [8-11]. C_3N یا نیترید کربن مانند گرافن یک ساختار شش ضلعی لانه زنبوری است که متشکل از اتم‌های کربن و نیتروژن می‌باشد که با پیوند کووالانسی با یکدیگر پیوند دارند (شکل ۱). در این ساختار، هر اتم نیتروژن با سه اتم کربن احاطه شده است. توزیع یکنواخت اتم‌های نیتروژن در این ساختار و شعاع اتمی مشابه کربن و نیتروژن سبب شده است تا ساختار نیترید کربن در بین سایر مواد دو بعدی به صورت منحصر به فرد درآید. با توجه به ساختار قابل توجه نیترید کربن، خواص چند منظوره‌ای را می‌-توان برای آن برشمرد. نیترید کربن دارای رسانایی حرارتی بالا در حدود ۸۱۵ W/mK، فاصله باند ۱/۰۴۲ eV، رسانایی الکتریکی بالا برابر با ۱/۴۱×۱۰۳ S/cm و استحکام ۳۵ گیگاپاسکال است. با توجه به این ویژگی‌ها، نیترید کربن به عنوان یک گزینه ایدئال برای کاربردهای در مقیاس نانو و در زمینه‌های الکترونیک، الکترونیک نوری و حسگرها معرفی شده است [12-14].



شکل ۱ مدل اولیه ساختار لانه زنبوری نیترید کربن

اگرچه شکل ساختاری نیترید کربن به صورت شش ضلعی و لانه زنبوری است و کنار هم قرار گرفتن آن‌ها بدون مانع است، اما در دنیای واقعیت، وجود حفره‌ها و عیوب درون این مواد باعث اثرگذاری آن‌ها بر خواص مختلف می‌گردد. ترک و مرزدانه‌ها به عنوان یکی از مهم‌ترین نقص‌های موجود در این ساختارها معرفی شده‌اند که اجتناب‌ناپذیر هستند. این عیوب هندسی که تحت بارگذاری خارجی ایجاد می‌شوند، سبب ایجاد تغییر شکل هندسی درون صفحه و خارج از صفحه می‌شوند و بر خواص مختلف این ساختارها تأثیر می‌گذارند [15]. مرزدانه‌ها می‌توانند به شکل‌های مختلف در یک ساختار ایجاد شوند. زمانی که تعداد آن‌ها در یک ساختار افزایش یابد، ساختار از حالت مونوکریستال به پلی‌کریستال تبدیل می‌شود که از کنار هم قرار گرفتن چندین ناحیه تشکیل می‌شوند که به وسیله این مرزدانه‌ها مرزبندی می‌شوند و از یکدیگر جدا می‌شوند. هر یک از ساختارهای دو بعدی بسته به نوع مرزدانه‌ها و نحوه چینش آن‌ها کنار یکدیگر، رفتار متفاوتی را از خود نشان می‌دهند [16]. همچنین، ترک با ایجاد شدن در فضاهای مختلف یک ساختار مانند لبه‌های آن یا مرکز ساختار، تأثیر به‌سزایی بر خواص مختلف مواد مورد بررسی دارند. در این زمینه تحقیقات گسترده‌ای صورت گرفته است.

فن و همکاران [17] نشان دادند که مرزدانه‌ها منجر به

نوسانات درون صفحه‌ای گرافن می‌شود که برای کاهش تغییر انرژی مرزدانه‌ها و همچنین، طول پیوند اتم‌های کربن و تنش اولیه مفید است. ژانگ و همکاران [18] با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی فرم‌های مختلفی از مزردانه‌ها در دماهای مختلف پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که رابطه مستقیمی بین زاویه انحراف جهت کریستال و قدرت ذاتی مرزدانه‌ها وجود ندارد و بیشتر تحت تأثیر زاویه خمش و انرژی مرزدانه‌ها هستند. در تحقیقی دیگر، دادرسی و همکاران [19] با استفاده از دینامیک مولکولی به بررسی خواص مکانیکی ساختار مونوکریستال و پلی‌کریستال BC_3 پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که افزایش نواحی در ساختار پلی‌کریستال باعث کاهش خواص مکانیکی می‌گردد. همچنین، افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۰۰۰ کلوین نیز کاهش مدول یانگ، تنش و کرنش شکست را به همراه دارد. باقری و همکاران [20] خواص مکانیکی ساختار پلی‌کریستال نیترید کربن را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد آزمایش قرار دادند. تغییرات نرخ کرنش، تغییرات دما، تغییرات تعداد ناحیه و افزایش طول ترک به عنوان پارامترهای اثرگذار بر خواص مکانیکی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج آن‌ها نشان داد که افزایش طول ترک از 0L به L/3 در ساختار پلی‌کریستال موجب کاهش خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست می‌گردد. همچنین، افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۰۰۰ کلوین نیز کاهش خواص مکانیکی این ساختار را به همراه دارد. از سویی دیگر، افزایش تعداد ناحیه از ۳ ناحیه به ۲۵ ناحیه سبب افزایش مدول یانگ و تنش شکست گشته است. خواص مکانیکی ساختارهای مونوکریستال و پلی‌کریستال SiC با بهره‌گیری از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به وسیله مولایی و همکاران [21] مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج آن‌ها نشان داد که خواص مکانیکی در راستای آرمچیر بالاتر از زیگزاگ است. همچنین، افزایش دما سبب کاهش خواص مکانیکی در هر دو راستا می‌شود. از سویی دیگر، در ساختارهای پلی‌کریستال، افزایش تعداد ناحیه موجب کاهش مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست شده است. افزایش طول ترک از ۲۵ آنگستروم به ۱۵۰ آنگستروم کاهش خواص مکانیکی را به همراه داشته است. شیشیر و همکاران [22] خواص مکانیکی ساختار مونوکریستال نیترید کربن را با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد آزمایش قرار دادند. آن‌ها به بررسی خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش شکست و چقرمگی شکست در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ برای دما و طول ترک‌های مختلف پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که افزایش دما و طول ترک سبب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد. همچنین، اثر این دو المان در راستای زیگزاگ نسبت به راستای آرمچیر بالاتر گزارش شد. از سویی دیگر، افزایش طول ترک برای هر دو راستای آرمچیر و زیگزاگ افزایش خاصیت مکانیکی چقرمگی شکست را به همراه داشته است. در مطالعه‌ای دیگر، شیرازی و همکاران [23] خواص مکانیکی ساختار نیترید کربن را در حضور ترک با طول‌های مختلف مورد مطالعه قرار دادند. نتایج آن‌ها بیانگر آن است که مقدار تنش شکست از ۱۴۰ گیگاپاسکال در دمای ۲۰۰ کلوین برای ساختار بدون ترک به ۴۰ گیگاپاسکال در دمای ۲۰۰ کلوین و با طول ترک ۱۵۰ آنگستروم کاهش یافته است. از سویی دیگر، مقدار چقرمگی شکست برای ساختار با طول ترک ۲۵ آنگستروم از ۶/۰۱ $MPa.m^{-0.5}$ در دمای ۲۰۰ کلوین به ۴/۹۹ $MPa.m^{-0.5}$ در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافته است.

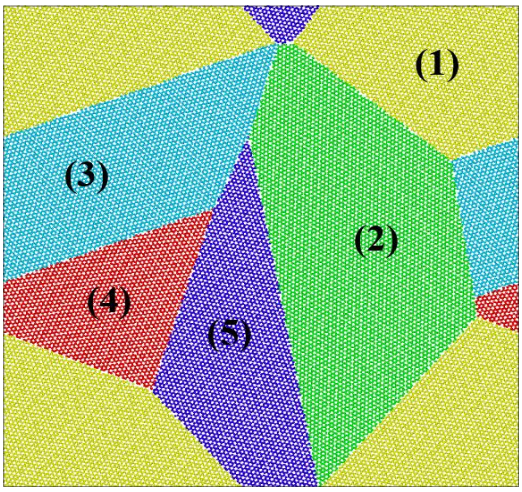
با توجه به مطالب ارائه شده، اگرچه که تحقیقات گسترده‌ای در زمینه ساختارهای مونو کریستال و پلی‌کریستال صورت گرفته است، اما کماکان سؤال‌های مختلفی در مورد توضیح رفتار مکانیکی و شکست ساختار نیترید کربن وجود دارد. حضور ترک به عنوان نقص هندسی بر نیترید کربن چه تأثیری دارد؟ اثر افزایش دما بر ساختار نیترید کربن به چه صورت است؟ تعداد نواحی ساختار پلی‌کریستال بر خواص مکانیکی اثر یکسان و مشابه دارد؟ تغییرات طول ترک چه اثری بر مدول یانگ و تنش شکست می‌گذارد؟ برای این منظور، نانوصفحات تک کریستالی و پلی‌کریستالی نیترید کربن با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفته است. ابتدا به بررسی ساختارهای مونوکریستال نیترید کربن در دماهای مختلف و در دو جهت بارگذاری آرمچیر و زیگزاگ خواهیم پرداخت. در مرحله بعد، با در نظر گرفتن پنج نوع از ساختار پلی‌کریستال نیترید کربن در دماهای مختلف، خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست مورد بررسی قرار خواهد گرفت. شایان ذکر است که برای هر نوع از این نواحی، چهار حالت مختلف در نظر گرفته شده است. سپس، اثر تغییرات طول ترک مورد آزمایش قرار خواهد گرفت. در نهایت، مقادیر بهینه پارامتر مکانیکی با

استفاده از روش الگوریتم ژنتیک گزارش خواهد شد. انتظار می‌رود یافته‌های این پژوهش برای درک بهتر خواص مکانیکی، توزیع تنش و طراحی ساختاری مواد دو بعدی مفید واقع شود و علاقه محققان را برای کاوش بیشتر در این زمینه فراهم سازد.

روش‌های محاسبات

در این مطالعه، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای مدل‌سازی و تحلیل خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش شکست و کرنش شکست نانوصفحات نیترید کربن استفاده شده است [24]. از آنجایی که نتایج به دست آمده از دینامیک مولکولی تحت تأثیر دقت توابع مورد استفاده برای اجرای برهمکنش‌های اتمی و شرایط بارگذاری است، برای این منظور، از پتانسیل Tersoff برای بیان و توصیف برهمکنش‌های بین اتمی C-C و C-N استفاده شده است [25]. پتانسیل ترسوف به دلیل دارا بودن توابع two و three-body قادر به تشخیص مناسب و کافی وابستگی زاویه‌ای مورد نیاز برای توضیح یک پیوند کووالانسی است. همچنین، برای تجسم و نظارت بر خروجی‌های مورد بررسی و موقعیت‌یابی اتم‌ها از نرم‌افزار OVITO (Open visualization tool) استفاده شده است [۲۶]. همان طور که در شکل (۱) مشاهده می‌شود، نانو ورق تک لایه نیترید کربن که در آن، هر اتم نیتروژن به وسیله سه اتم کربن احاطه شده است، در محاسبات دینامیک مولکولی مورد استفاده قرار گرفته است. دو جهت بارگذاری زیگزاگ و آرمچیر به ترتیب بیانگر جهات X و Y می‌باشد. خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش شکست و کرنش شکست ساختارهای دو بعدی نیترید کربن با طول و عرض ۱۰ نانومتر×۱۰ نانومتر در دو جهت آرمچیر و زیگزاگ در بازه دمایی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین بررسی شده است. برای محاسبه مدول یانگ از شیب قسمت خطی هر نمودار استفاده شده است.

بررسی خواص مکانیکی برای ساختار پلی‌کریستال با تعداد ناحیه ۵، ۱۶، ۲۴، ۳۲ و ۵۳ ناحیه مورد مطالعه قرار گرفته است. این مدل‌ها با توزیع تصادفی نواحی با ۴ حالت مختلف در جعبه شبیه‌سازی آزمایش شده است. نواحی به وسیله مرزدانه‌ها در حالت‌های مختلف به یکدیگر متصل شده‌اند (شکل ۲). علاوه بر این، ۳ طول ترک ۵، ۱۲ و ۲۵ آنگستروم به عنوان ترک لبه‌ای مورد مطالعه قرار گرفته است. در این مرحله، ابتدا، ناحیه ترک با اندازه مشخص تعیین و ایجاد شده است و سپس، اتم‌های آن گروه مشخص شده با استفاده از دستور حذف اتم، حذف می‌شوند. شرایط مرزی دوره‌ای در هر دو جهت X و Y برای حذف اثر طول محدود برای تولید آزمایش‌های بارگذاری کششی تک محوری بر نانوورق‌های مورد بررسی، استفاده شده است. زمانی که کشش در راستای X صورت می‌پذیرد، جعبه شبیه‌سازی در همین جهت تغییر شکل می‌دهد. بنابراین، هنگامی که بار در این جهت اعمال می‌شود، طول جعبه در جهت X افزایش می‌یابد و در همین زمان، طول جعبه در جهت Y کاهش می‌یابد. این چرخه مدام در حال تکرار می‌باشد. به همین منظور، این شرایط به صورت دوره‌ای فرض شده است.



شکل ۲ ساختار پلی‌کریستال نیترید کربن با ۵ ناحیه

برای ایجاد فرایند بازپخت نانوساختار نیترید کربن، ساختارها به مدت ۴۰ ps تا دمای ۱۰۰۰ کلوین گرم شدند و سپس، قبل از اعمال بار کششی، به مدت ۴۰ ps به دمای محیط سرد شدند و با استفاده از فرایند NVT، شرایط بازآرایی اتم‌ها در مرزدانه‌های ساختار پلی‌کریستال تسهیل گشت [27]. در تمام موارد شبیه‌سازی، ابتدا با اعمال الگوریتم Nose-Hoover در دما و فشار ثابت و با استفاده از گام زمانی ۰/۰۰۱ ps، سیستم برای مدت زمان ۵۰ ps به حالت تعادل رسیده است. همچنین، سیستم‌های مورد بررسی تحت بار کششی با نرخ کرنش ۰/۰۰۱ ps^{-1} قرار گرفته‌اند. نرخ کرنش با توجه به اندازه هر ساختار و با توجه به اتم‌های موجود در هر ساختار انتخاب می‌گردد. از آنجایی که تغییرات ناشی از فشار بالا در میان اتم‌های نیتروژن و کربن در ساختار نیترید کربن باید کنترل شود، مناسب‌ترین مقدار برای نرخ

کرنش، ps^{-1} ۰/۰۰۱ می‌باشد [19].

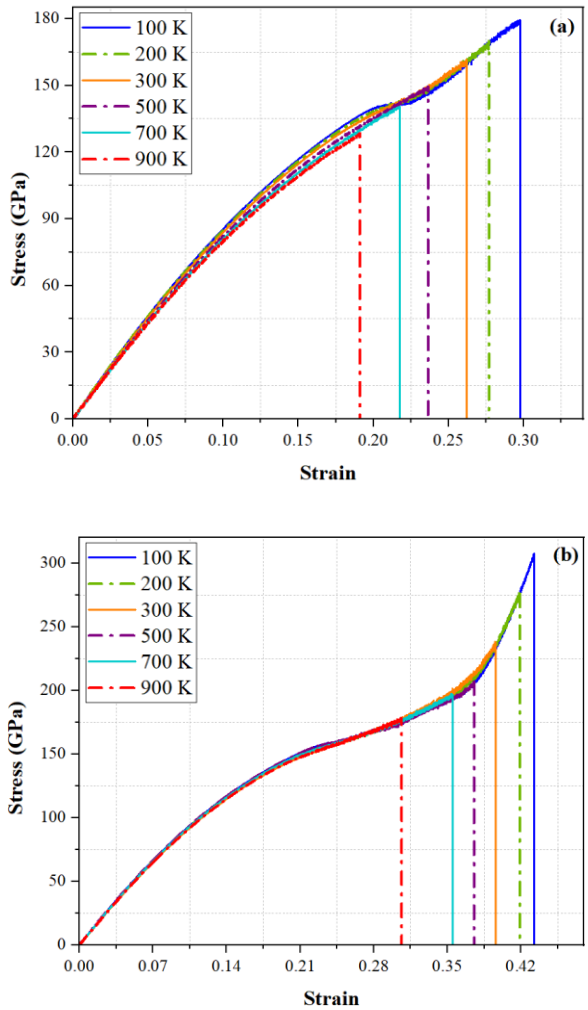
نتایج و بحث

خواص مکانیکی مونوکریستال نیترید کربن به عنوان تابعی از دما

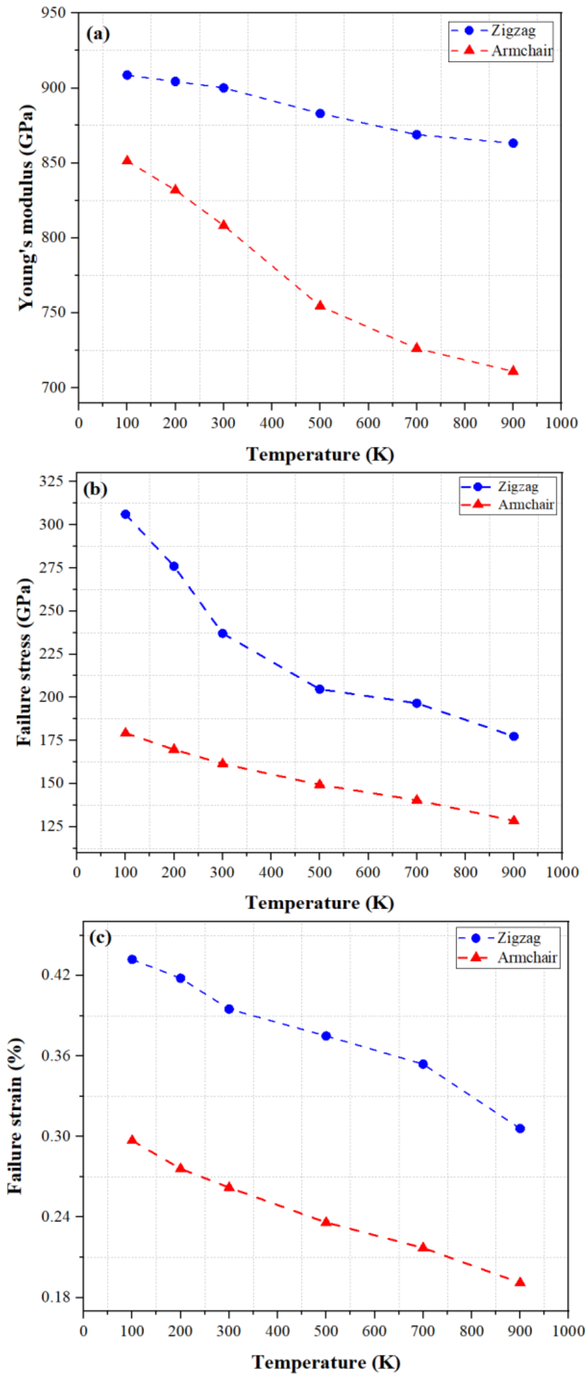
برای بررسی اثر تغییرات دما از ۱۰۰ کلوین تا ۹۰۰ کلوین، رفتار شک ست ساختار مونوکریستال نیترید کربن در دو را ستای آرمچیر و زیگزاگ مورد مطالعه قرار گرفت. تمام نمونه‌ها برای هر دو ساختار تحت بارگذاری کششی تک محوری قرار گرفتند و نتایج خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش شک ست و کرنش شکست آن‌ها گزارش شد.

کشش در راستای آرمچیر. منحنی‌های تنش-کرنش ساختار مونوکریستال نیترید کربن بارگذاری شده در جهت آرمچیر در شکل (۳-a) نشان داده شده است. همچنین، شکل (۴) نشان دهنده تمام خصوصیات مکانیکی از جمله مدول یانگ، تنش و کرنش شکست برای ساختار مورد بررسی است. نتایج به دست آمده در این قسمت نشان دهنده آن است که خصوصیات مکانیکی در جهت زیگزاگ بالاتر از جهت آرمچیر می‌باشد. علاوه بر این، خواص مکانیکی در هر دو راستا به طور چشم‌گیری با افزایش دما کاهش می‌یابد. از آنجایی که افزایش دما سبب افزایش طول پیوندهای C-C و C-N و در نتیجه، کاهش انرژی اتصال اتم‌ها می‌شود، این امر به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی یاد می‌شود. در قسمت خطی نمودارهای تنش-کرنش، ساختار مقاومت مناسبی را از خود نشان می‌دهد و پس از ورود به قسمت غیرخطی و با افزایش کرنش، ساختار به نقطه شکست می‌رسد و تنش به طور ناگهانی کاهش می‌یابد.

در جهت آرمچیر، مقدار مدول یانگ از ۸۵۱/۲۷ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلیون به ۷۱۱/۰۲ گیگاپاسکال در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافته است که معادل ۱۶/۴۷ درصد کاهش را نشان می‌دهد. کاهش تنش شکست و کرنش شکست در دماهای بالاتر برای ساختار مونوکریستال نیترید کربن قابل توجه‌تر بود. تنش شکست با کاهش ۲۸/۳۴ درصدی از حدود ۱۸۰ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به حدود ۱۳۰ گیگاپاسکال در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافت. خاصیت کرنش شکست نیز کاهش ۳۵/۶۹ درصدی را از خود نشان داده است. مقدار این خاصیت از ۰/۲۹۷ در دمای ۱۰۰ کلوین به ۰/۱۹۱ در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافته است. شایان ذکر است که مدول الاستیک در مقیاس اتمی ارتباط مستقیمی با پیوندهای شیمیایی دارد و افزایش دما منجر به تضعیف این پیوندها می‌گردد. یک روند نزولی خواص مکانیکی با افزایش دما برای ساختار نیترید بور به وسیله باقری و همکاران گزارش شده است[28]. در مطالعه‌ای دیگر، مولایی و همکاران کاهش ۱۶/۱۹، ۴۱/۱۳ و ۴۲/۱۱ درصدی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست ساختار کاربید سیلیسیم را با افزایش دما گزارش کرده اند [21].



شکل ۳ تغییرات تنش-کرنش ساختار مونوکریستال نیترید کربن، a) کشش در راستای آرمچیر و b) کشش در راستای زیگزاگ



شکل ۴ a) مدول یانگ، b) تنش شکست و c) کرنش شکست مونوکریستال نیترید کربن در دماهای مختلف

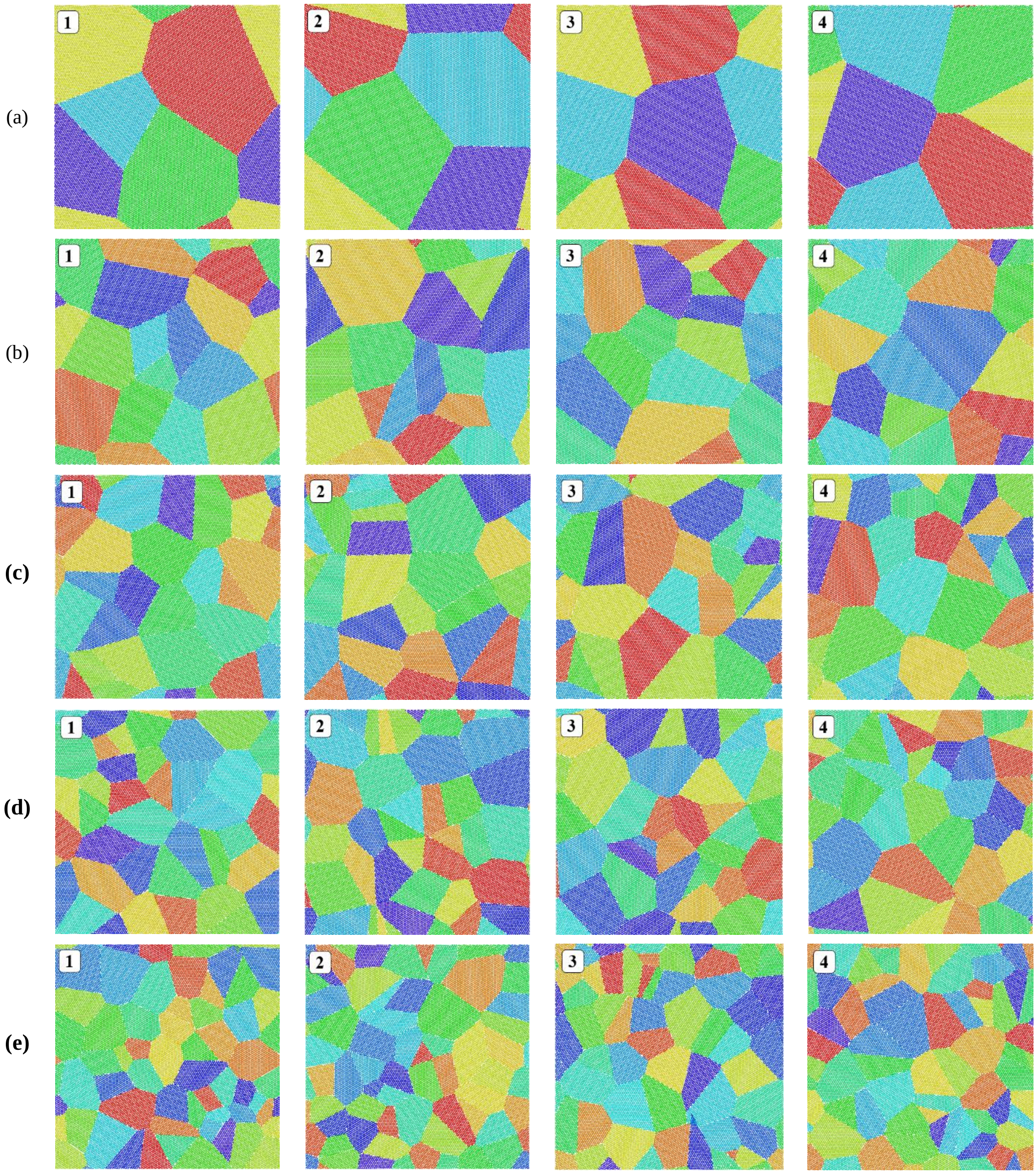
کشش در راستای زیگزاگ. در این بخش به بررسی خواص مکانیکی مونوکریستال نیترید بور با در نظر گرفتن تغییرات دما در جهت بارگذاری کششی زیگزاگ پرداخته شده است. منحنی-های تنش-کرنش در شکل (۳-b) و تغییرات خواص مکانیکی به عنوان تابعی از دما در شکل (۴) نشان داده شده است. رفتار شکست ساختار مورد مطالعه در هر دو جهت بارگذاری آرمچیر و زیگزاگ یکسان بوده است. بدین معنا که در جهت زیگزاگ نیز افزایش دما باعث کاهش خواص مکانیکی شده است. همان طور که در شکل (۴) مشاهده می‌شود، خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست با افزایش دما از ۱۰۰ به ۹۰۰ کلوین یافته است. بنابراین، حداکثر خواص مورد بررسی برای دمای ۱۰۰ کلوین به دست آمده است، در حالی که کمترین خواص برای دمای ۹۰۰ کلوین گزارش شده است. به عنوان مثال، حداکثر مدول یانگ برای ساختار مونوکریستال نیترید کربن در دمای ۱۰۰ کلوین برابر با ۹۰۸/۶۷ گیگاپاسکال گزارش شده است. این خاصیت با افزایش دما به ۹۰۰ کلوین حدود ۵ درصد کاهش یافت. علاوه بر این، تنش شکست از ۳۰۶/۱۱ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۱۷۷/۴۳ گیگاپاسکال کاهش یافت که معادل ۴۲/۰۳ درصد کاهش را نشان می‌دهد. خاصیت کرنش شکست نیز حدود ۳۰ درصد کاهش (از ۰/۴۳۲ درصد به ۰/۳۰۶ درصد) را نشان می‌دهد. با توجه به ساختار شش ضلعی نیترید کربن، زاویه بین تنش بارگذاری شده و باندهای یک ساختار شش ضلعی به ترتیب ۶۰ درجه و ۳۰ درجه در راستای زیگزاگ و آرمچیر است که این امر سبب می‌شود تا تنش خارجی بیشتری برای گسیختگی در جهت زیگزاگ نیاز باشد. بنابراین، نسبت مقدار تنش نهایی در راستای زیگزاگ باید $\sqrt{3}$ برابر (۱/۷۳ برابر) جهت آرمچیر باشد [29].

با نگاهی کلی به نتایج بررسی شده در این قسمت، می‌توان یافت که بیشترین مقادیر خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست برای ساختار مونوکریستال نیترید کربن در کمترین دما و در راستای زیگزاگ به دست آمده است که به ترتیب برابر است با ۹۰۸/۶۷ گیگاپاسکال، ۳۰۶/۱۱ گیگاپاسکال و ۰/۴۳۲ درصد.

خواص مکانیکی پلی‌کریستال نیترید کربن

از آنجا که در دنیای واقعی، نانوصفحات به صورت کاملا تک کریستالی حضور ندارند و معمولا هر لایه از بخش‌های مختلف کریستالی که به صورت تصادفی و در جهات مختلف کنار هم قرار گرفته‌اند، تشکیل شده است. این نواحی با مرزدانه‌هایی که از حلقه‌ها با شکل‌های مختلف هشت ضلعی، هفت ضلعی و پنج ضلعی تشکیل شده است، روبه‌روی یکدیگر قرار می‌گیرند [30]. از همین رو، تعداد نواحی و نحوه چینش آن‌ها کنار یکدیگر به

عنوان یک المان اثرگذار بر خواص مکانیکی نانوورق‌های پلی‌کریستالی مورد بحث قرار می‌گیرد. در این بخش، رفتار مکانیکی و شکست ساختار پلی‌کریستال نیترید کربن با تعداد ناحیه ۵، ۱۶، ۲۴، ۳۲ و ۵۳ با چهار چینش تصادفی و در ۳۰۰ کلوین مورد بررسی قرار گرفته است. شکل (۵) نشان دهنده ساختارهای کریستالی نیترید کربن برای تعداد نواحی مختلف است.

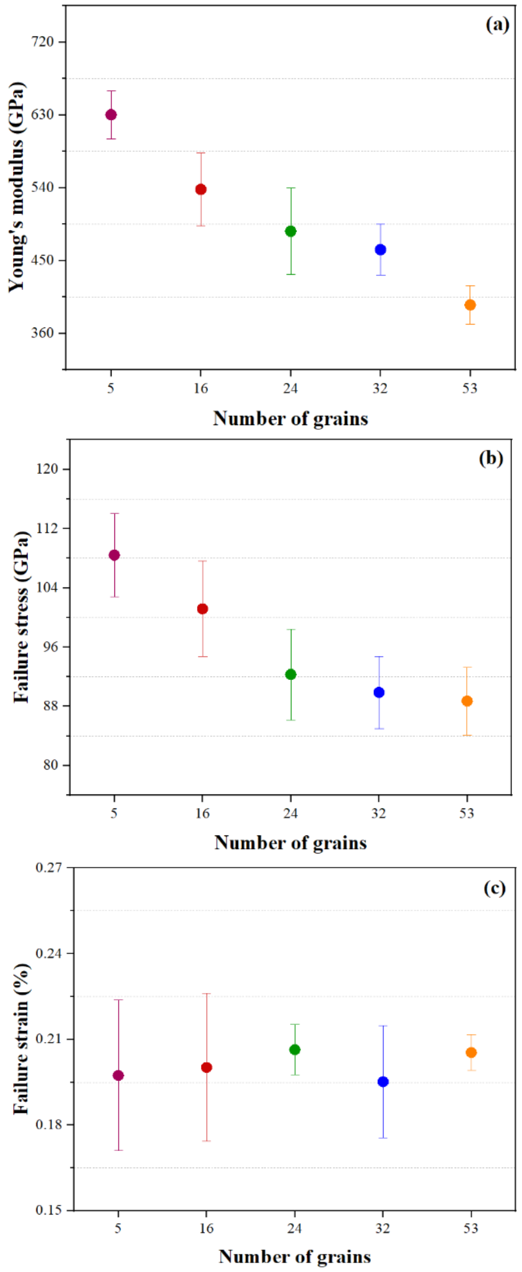


شکل ۵ نمای بالا از ساختارهای پلی‌کریستال نیترید کربن با چینش تصادفی ۱، ۲، ۳ و ۴ و با تعداد ناحیه a) ۵، b) ۱۶، c) ۲۴، d) ۳۲، e) ۵۳

تأثیر تغییرات تعداد ناحیه بر رفتار شکست پلی‌کریستال نیترید کربن. میانگین تغییرات مدول یانگ، تنش شکست و کرنش شکست ساختار پلی کریستار نیترید کربن به عنوان تابعی از تعداد ناحیه و در دمای ۳۰۰ کلوین در شکل (۶) نشان داده شده است. بر اساس این شکل، با افزایش تعداد ناحیه، مقادیر مدول یانگ (شکل ۶–a) و تنش شکست (شکل ۶–b) کاهش می‌یابد. این در حالی است که افزایش تعداد ناحیه باعث افزایش کرنش شکست (شکل ۶–c) شده است. رفتار نامنظم در خاصیت کرنش شکست را می‌توان به مواردی همچون افزایش فاصله بین اتم‌ها در دماهای بالا، کاهش انرژی اتصال و تضعیف پیوند شیمیایی نسبت داد [23]. با توجه به نتایج به دست آمده، با افزایش تعداد ناحیه از ۵ ناحیه به ۵۳ ناحیه، خواص مکانیکی یاد شده به ترتیب ۳۲/۴۸، ۱۷/۲۷ و ۱/۱۱ درصد در پلی‌کریستال نیترید کربن تغییر کردند. به طور معمول، برهم‌کنش بین اتم‌های واقع در مرزدانه‌ها در مقایسه با اتم‌هایی که داخل نواحی قرار دارند، ضعیف‌تر است که به عنوان دلیل اصلی گرادیان تنش در ساختارهای پلی‌کریستال در مقایسه با ساختارهای مونو کریستال بیان می‌شود. این امر سبب می‌شود تا تمرکز تنش در مجاورت مرزدانه‌ها افزایش یابد و خواص مکانیکی را کاهش دهد [31,32].

مقایسه نتایج به دست آمده از ساختار مونوکریستال و پلی‌کریستال نشان می‌دهد که مقادیر گزارش شده از ساختار مونوکریستال نیترید کربن در هر دو جهت آرمچیر و زیگزاگ بالاتر از نتایج پلی‌کریستال است. به عنوان مثال، تنش شکست ساختار مونوکریستال در جهت زیگزاگ و آرمچیر و در دمای ۳۰۰ کلوین به ترتیب ۲۳۷/۰۴ و ۱۶۱/۵۷ گیگاپاسکال گزارش شده است که در مقایسه با ساختار پلی‌کریستال با ۵ ناحیه و در دمای ۳۰۰ کلوین حدود ۵۴ و ۳۳ درصد کاهش یافته است. همچنین، شایان ذکر است که تفاوت بین مقادیر تنش محاسبه شده برای ساختار پلی‌کریستال که به صورت تصادفی تشکیل شده‌اند و تعداد ناحیه یکسانی دارند، ناچیز است.

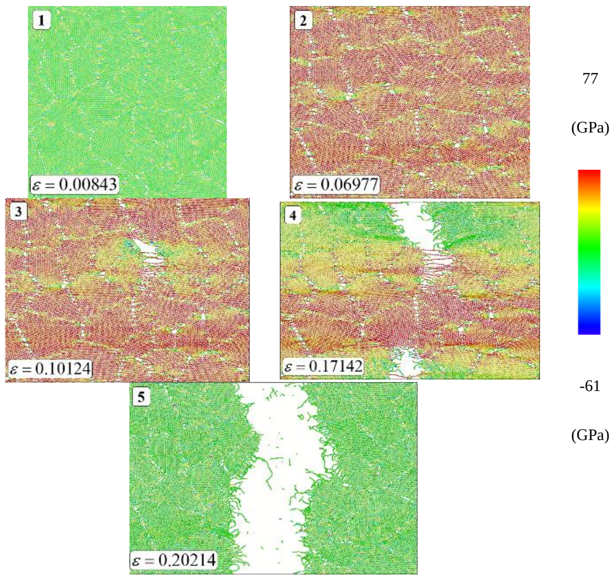
از آنجایی که هر چه تعداد ناحیه در یک ساختار پلی‌کریستال بیشتر باشد، تعداد اتم‌هایی که در مرزدانه‌ها قرار می‌گیرند، بیشتر می‌شود. در نتیجه، این مناطق به صورت همگن در ساختار اتمی توزیع می‌شوند که هر چه تعداد این مناطق بیشتر باشد، ساختار پلی‌کریستال مورد بررسی می‌تواند در جریان یکنواخت بارگذاری تک محوری، کرنش بالاتری را تجربه کند. برخی از تحقیقات صورت گرفته در این زمینه به بررسی ساختارهای مختلف پلی‌کریستال پرداخته‌اند. به عنوان مثال، لی و همکاران [33] با مقایسه دو ساختار مونو و پلی‌کریستال گرافن نشان دادند که تنش شکست ساختار مونوکریستال ۲۵ درصد بالاتر از پلی‌کریستال می‌باشد. همچنین، یک روند مشابه برای نانوصفحات نیترید بور و پلی‌کریستال گرافن توسط مرتضوی و همکاران گزارش شده است [34,35]. از سویی دیگر، باقری و همکاران [20] نشان دادند که افزایش تعداد ناحیه برای پلی‌کریستال نیترید کربن از ۳ ناحیه به ۲۵ ناحیه سبب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد.



شکل ۶ a) مدول یانگ، b) تنش شکست و c) کرنش شکست پلی‌کریستال نیترید کربن به عنوان تابعی از تعداد ناحیه

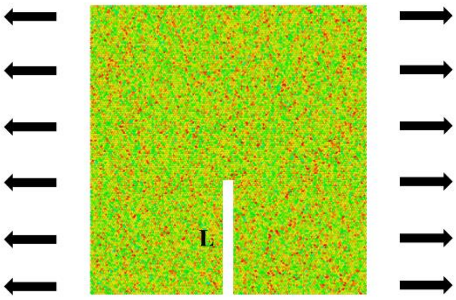
در بین ساختارهای پلی‌کریستال مورد مطالعه، ساختار با ۵۳ ناحیه با میانگین مقادیر ۳۹۹/۰۹ گیگاپاسکال و ۸۸/۷۱

گیگاپاسکال برای مدول یانگ و تنش شکست به عنوان همگن‌ترین ساختار در مقایسه با ساختارهای دیگر معرفی گردید. بنابراین، ساختار با ۵۳ ناحیه و چینش تصادفی شماره ۳ (شکل ۵) برای مرحله بعد انتخاب شد. شکل (۷) روند شکست ساختار پلی‌کریستال نیترید کربن با ۳۲ ناحیه و چینش تصادفی شماره ۱ در دمای ۳۰۰ کلوین را نشان می‌دهد. همان طور که مشخص است، افزایش کرنش و جدا شدن پیوندهای کربن–کربن و کربن–نیتروژن سبب پیدایش حفره‌های ریز در امتداد مرزدانه‌ها می‌شود. این حفره‌ها همچون ترک‌های کوچک عمل کرده و در امتداد مرزدانه‌ها منتشر می‌شود که منجر به کاهش مقاومت ساختار می‌شود. در نهایت، این ترک‌ها در جهت عمود بر بارگذاری کششی و به وسیله جدا کردن اتم‌هایی که در مجاورت مسیر خود قرار دارند، شکست ساختار را رقم می‌زنند.



شکل ۷ روند شکست ساختار پلی‌کریستال نیترید کربن با ۳۲ ناحیه، چینش تصادفی شماره ۱ و در دمای ۳۰۰ کلوین

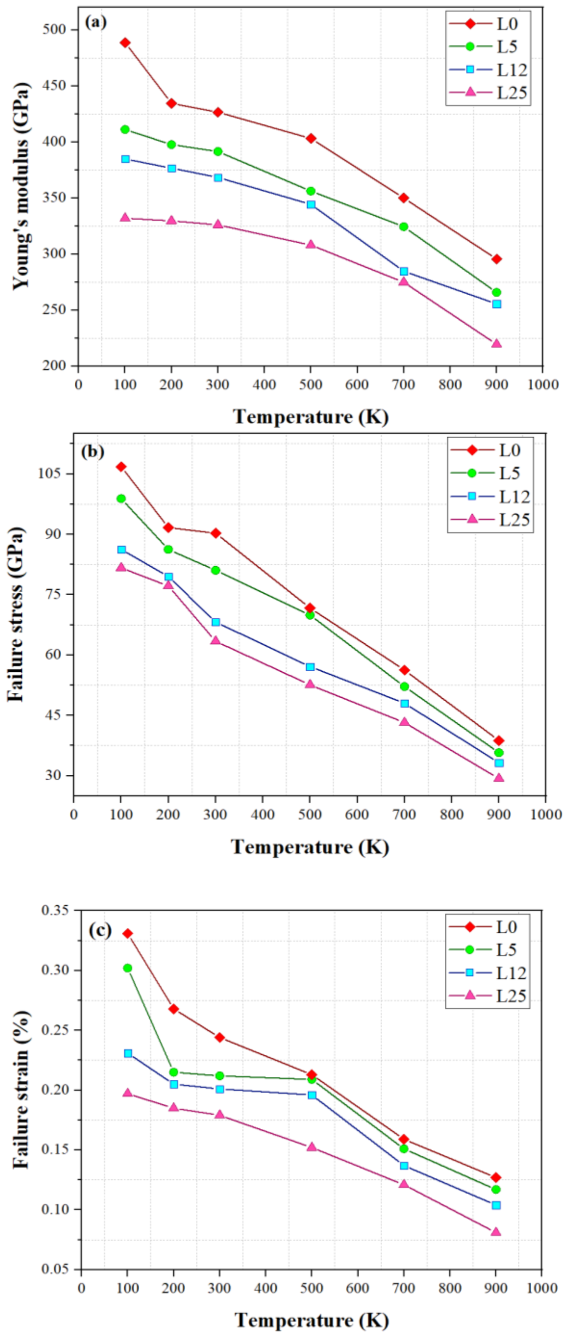
تأثیر طول ترک و تغییرات دما بر رفتار شکست پلی‌کریستال نیترید کربن. علاوه بر مرزدانه‌ها در نانوصفحات نیترید کربن، افزایش دما و ترک به عنوان یک نقص هندسی بر عملکرد مکانیکی ساختار پلی‌کریستال مورد بررسی، اثرگذار هستند. همان طور که قبل‌تر اشاره شد، ساختار با تعداد ۵۳ ناحیه به عنوان یک ساختار همگن (نسبت به دیگر ساختارها) معرفی گردید و در این بخش، این ساختار با چینش تصادفی شماره ۳ تحت بارگذاری محوری قرار گرفته است. محل قرارگیری ترک و جهت بارگذاری در شکل (۸) نشان داده شده است. ترک با طول‌های ۵، ۱۲ و ۲۵ آنگستروم مورد مطالعه قرار گرفته است.



شکل ۸ محل قرار گیری ترک با طول L و جهت بارگذاری در راستای X

همان طور که در شکل (۹) نشان داده شده است، تمام المان‌های مکانیکی از قبیل مدول یانگ، تنش شکست و کرنش شکست با افزایش دما و افزایش طول ترک یک روند نزولی را پیموده‌اند. بالاترین خواص گزارش شده برای ساختار بدون ترک در دمای ۱۰۰ کلوین است، در حالی که کمترین مقادیر به دست آمده برای ساختار با طول ترک ۲۵ آنگستروم و در دمای ۹۰۰ کلوین ارائه شده است. همان طور که در شکل (a–۹) نشان داده شده است، مدول یانگ برای ساختار بدون ترک ۴۴۸/۶۸ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به دست آمد و با افزایش دما تا ۹۰۰ کلوین، حدود ۳۵ درصد کاهش یافت و به مقدار ۲۹۵/۵۱ گیگاپاسکال رسید. مدول یانگ برای صفحات با طول‌های ترک ۵، ۱۲ و ۲۵ آنگستروم نیز روند نزولی خود را پیمودند. به عنوان مثال، مقدار این خاصیت مکانیکی برای طول‌های ترک یاد شده و در دمای ۱۰۰ کلوین، به ترتیب ۴۱۱/۱۶، ۳۸۴/۸۱ و ۳۳۱/۹۷ گیگاپاسکال گزارش شده است که معادل ۸/۳، ۱۴/۲۲ و ۲۶ درصد کاهش یافته‌اند. شکل (b–۹) روند تغییرات تنش شکست ساختار پلی‌کریستال نیترید کربن را در شرایط مختلف نشان می‌دهد. تنش شکست برای ساختار بدون ترک و در دمای ۹۰۰ کلوین تقریبا یک سوم تنش در دمای ۱۰۰ کلوین گزارش شده است (۳۸/۷۶ گیگاپاسکال در مقایسه با ۱۰۶/۸۲ گیگاپاسکال). این رفتار کاهشی را می‌توان به غلبه فاصله بین اتمی بر اثر تغییرات دما و به دنبال آن، کاهش انرژی اتصال، تضعیف پیوندهای شیمیایی و در نتیجه، کاهش خواص مکانیکی نسبت داد. همچنین، تنش شکست برای ساختار با طول ترک ۲۵ آنگستروم نزدیک به ۲۴ درصد و ۲۵ درصد کمتر از ساختار بدون ترک در دمای ۱۰۰ و ۹۰۰ کلوین به دست آمد. روند مشابهی برای کرنش شکست (شکل c–۹) نیز گزارش شد. کرنش

شکست ساختار بدون ترک از ۰/۳۳۱ در دمای ۱۰۰ کلوین به ۰/۱۲۷ به دست آمده است که نشان دهنده ۶۱/۶۳ درصد کاهش می‌باشد. در حالی که برای نمونه با طول ترک ۱۲ آنگستروم حدود ۴۳ درصد کاهش از دمای ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین را نشان می‌دهد.



شکل ۹ a) مدول یانگ، b) تنش شکست و c) کرنش شکست پلی‌کریستال نیترید کربن با ۵۳ ناحیه و چینش تصادفی شماره ۳، تحت تأثیر طول‌های ترک مختلف و تغییرات دما در محدوده ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین

زمانی که یک ساختار تحت بار کششی محوری قرار می‌گیرد، تغییر شکل به وسیله انتقال انرژی جنبشی به انرژی کرنش در دماهای بالاتر صورت می‌گیرد که منجر به شکست ساختار در نرخ کرنش‌های پایین‌تر می‌شود [36]. به طور کلی، کمترین خواص مکانیکی به دست آمده برای مدول یانگ، تنش و کرنش شکست برای ساختار پلی‌کریستال نیترید کربن با طول ترک ۲۵ آنگستروم و در دمای ۹۰۰ کلوین معادل ۲۱۹/۴۸ گیگاپاسکال، ۲۹/۳۱ گیگاپاسکال و ۰/۱۷۸ بود. یک روند نزولی برای ساختار MoS_2 توسط بائو و همکاران گزارش شد [37]. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که افزایش دما و تغییرات طول ترک برای این ساختار موجب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد. در مطالعه‌ای دیگر، زاهدی و همکاران [38] با کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، روند کاهش خواص مکانیکی ساختار کاربید بور را با افزایش طول ترک و تغییرات دما گزارش کردند.

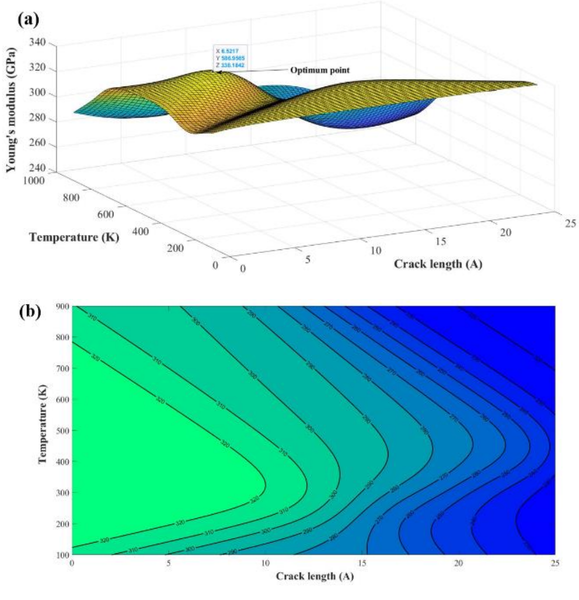
بهینه‌سازی

در این بخش، از روش الگوریتم ژنتیک برای دستیابی به مقدار بهینه خاصیت مکانیکی مدول یانگ استفاده شده است. الگوریتم ژنتیک به عنوان یک روش هوشمند و اکتشافی برای حل مسائل بهینه‌سازی در علوم مهندسی استفاده می‌شود که یک روش مقرون به صرفه نیز است. برای یافتن بهترین شرایط برای بهینه‌سازی شرایط مختلف آزمایشگاهی، الگوریتم ژنتیک یکی از بهترین روش‌ها می‌باشد. در این روش، جمعیتی از راه حل‌های کاندید برای شروع انتخاب می‌شوند که هر المان انتخابی دارای مجموعه‌ای از خواص (کروموزوم‌های مربوط به خود) است که این قابلیت را دارد تا جهش یافته و باعث افزایش جمعیت شود. راه حل‌ها به صورت دو به دو نشان داده می‌شود. هر المان به صورت تصادفی و در یک فرایند تکراری تلاش می‌کنند تا جمعیت افزایش یابد. در هر بخش و برای هر نسل، تابع هزینه برای هر المان ارزیابی می‌شود. فرد یا المان مناسب‌تر به صورت تصادفی از جمعیت انتخاب می‌شود و هر دو فرد انتخاب شده دو فرد جدید را ایجاد می‌کنند. زمانی این الگوریتم خاتمه می‌یابد که به حداکثر تعداد نسل یا یک سطح تناسب تعریف شده رسیده باشد [39,40].

با توجه به نتایج به دست آمده در بخش‌های قبلی، در این بخش، مقدار بهینه مدول یانگ برای ساختار پلی‌کریستال نیترید کربن با ۵۳ ناحیه و چینش تصادفی شماره ۳ مورد مطالعه قرار

گرفته است. شایان ذکر است که المان‌های ورودی برای بهینه‌سازی این خاصیت مکانیکی، دو پارامتر دما و طول ترم است. شرایط فرض شده برای بهینه‌سازی به روش الگوریتم ژنتیک به شرح زیر می‌باشد:

الگوریتم از نوع باینری بوده و برای هر متغیر ۱۰ بیت اختصاص داده شده است. به این ترتیب، تعداد بیت هر کروموزوم ۲۰ بیت است. نقاط شروع اولیه به صورت تصادفی انتخاب شده‌اند. تغداد نقاط هم‌پوشانی با توجه به طول کروموزوم، ۵ نقطه و احتمال جهش برابر با ۰/۰۱ فرض شده است. شکل (۱۰–a) نشان دهنده نمودار سه بعدی تغییرات مدول یانگ بر حسب دو متغیر دما و طول ترک می‌باشد. مقدار بهینه گزارش شده برای مدول یانگ در دما ۵۸۶/۹۵ کلوین و طول ترک ۶/۵۲ آنگستروم به دست آمده است و مقدار آن برابر با ۳۳۸/۱۸ است. همچنین، اثر دو پارامتر مورد بررسی در نمودار شکل (۱۰–b) به نمایش گذاشته شده است. همان طور که مشخص است، افزایش طول ترک سبب کاهش خاصیت مدول یانگ می‌گردد و بیشترین مقدار این خاصیت مکانیکی در بازه دمایی ۳۰۰ تا ۵۰۰ کلوین و طول ترک ۰/۱ تا ۳/۴ آنگستروم به دست آمده است. بازه‌های گزارش شده به طراح کمک می‌کند تا با انتخاب دما و طول ترک مناسب، بیشترین مقدار مدول یانگ را به دست آورد.



شکل ۱۰ a) نمودار سه بعدی مدول یانگ به ازای تغییرات دما و طول ترک و b) نمودار دو بعدی بر حسب تغییرات دما و طول ترک

جمع‌بندی

در این مطالعه، بررسی رفتار شکست نانوصفحات نیترید کربن در دو حالت مونوکریستال و پلی‌کریستال مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و با اعمال پتانسیل مناسب و شرایط مرزی دوره‌ای، تأثیر تغییرات دما و طول ترک مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که خواص مکانیکی مونوکریستال نیترید کربن بدون در نظر گرفتن جهت بارگذاری، با افزایش دما از ۱۰۰ کلوین به ۹۰۰ کلوین کاهش می‌یابد. شایان ذکر است که خواص مکانیکی نانوصفحات نیترید کربن در جهت زیگزاگ بالاتر از آرمچیر گزارش شد. بیشترین مقدار مدول یانگ در دمای ۱۰۰ کلوین، برابر با ۹۰۸/۶۷ گیگاپاسکال و در راستای زیگزاگ به دست آمد. در مقابل، کمترین مقدار این خاصیت مکانیکی در راستای آرمچیر و در دمای ۹۰۰ کلوین، معادل ۷۱۱/۰۲ گیگاپاسکال گزارش شد. همچنین، تنش شکست در راستای زیگزاگ از ۳۰۶/۱۱ گیگاپاسکال و در دمای ۱۰۰ کلوین به ۱۷۷/۴۳ گیگاپاسکال و در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافت که معادل ۴۲/۰۳ درصد است. علاوه بر این، اثر تغییرات دما بر پلی‌کریستال نیترید کربن با تعداد نواحی مختلف و چهار چینش تصادفی مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که افزایش تعداد ناحیه سبب کاهش مدول یانگ و تنش شکست می‌شود. مرزدانه‌ها به عنوان منبع اصلی تمرکز تنش ایفای نقش کردند و انتشار ترک از این نواحی صورت گرفت. همچنین، خواص مکانیکی پلی‌کریستال نیترید کربن پایین‌تر از مونوکریستال آن بود. سپس، سه طول ترک ۵، ۱۲ و ۲۵ آنگستروم به صورت ترک لبه‌ای در دماهای مختلف آزمایش شد. خواص مکانیکی به عنوان تابعی از دما و طول ترک کاهش یافت. مدول یانگ برای طول ترک ۲۵ آنگستروم از ۳۳۱/۹۷ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۲۱۹/۴۸ گیگاپاسکال و در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافت. همچنین، تنش شکست برای طول ترک ۱۲ آنگستروم برابر با ۶۱/۴۴ درصد کاهش یافت. در بخش پایانی، بهینه‌سازی مدول یانگ پلی‌کریستال با ۵۳ ناحیه و چینش تصادفی شماره ۳ مورد آزمایش قرار گرفت و نتایج نشان داد که مقدار بهینه این خاصیت مکانیکی معادل ۳۳۸/۱۸ گیگاپاسکال در دمای ۵۸۶/۹۵ کلوین و با طول ترک ۶/۵۲ آنگستروم گزارش شد.

فهرست علائم و اختصارات

علائم انگلیسی

E	مدول یانگ

σ	تنش شکست
ε	کرنش شکست
L	طول ترک
A	آنگستروم

واژه نامه

Monocrystalline	مونوکریستال
Polycrystalline	پلی کریستال
Armchair	آرمچیر
Zigzag	زیگزاگ
Grain boundary	مرزدانه
Simulation	شبیه سازی
Molecular dynamics	دینامیک مولکولی
Genetic algorithm	الگوریتم ژنتیک

تقدیر و تشکر

مراجع

[1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films," *Medicina Clinica*, vol. 146, no. 2, pp. 93–94, (2016). doi: 10.1016/j.medcli.2015.04.005.

[2] A. R. Albooyeh, A. Dadrasi, A. H. Mashhadzadeh, "Effect of point defects and low-density carbon-doped on mechanical properties of BNNTs: A molecular dynamics study," *Materials Chemistry and Physics*, vol. 239, pp. 122107, (2020). doi: 10.1016/j.matchemphys.2019.122107.

[3] P. Samadipakchin, H. R. Mortaheb, A. Zolfaghari, "ZnO nanotubes: Preparation and photocatalytic performance evaluation," *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, vol. 337, pp. 91–99, (2017). doi: 10.1016/j.jphotochem.2017.01.018.

[4] A. Hamed Mashhadzadeh, A. Fereidoon, M. Ghorbanzadeh Ahangari, "Atomistic modeling of interfacial interaction between polyvinyl chloride and polypropylene with Boron-Nitride monolayer sheet: A density functional theory study," *Superlattices and Microstructures*, vol. 111, pp. 23–31, (2017). doi: 10.1016/j.spmi.2017.04.038.

[5] A. Hamed Mashhadzadeh, M. Ghorbanzadeh Ahangari, A. Salmankhani, M. Fataliyan, "Density functional theory study of adsorption properties of non-carbon, carbon and functionalized graphene surfaces towards the zinc and lead atoms," *Physica. E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 104, pp. 275–285, (2018). doi: 10.1016/j.physe.2018.08.010.

[6] M. G. Ahangari, A. H. Mashhadzadeh, M. Fathalian, A. Dadrasi, Y. Rostamiyan, A. Mallahi, "Effect of various defects on mechanical and electronic properties of zinc-oxide graphene-like structure: A DFT study," *Vacuum*, vol. 165, pp. 26–34, (2019). doi: 10.1016/j.vacuum.2019.04.003.

[7] T. Kuila, S. Bose, A. K. Mishra, P. Khanra, N. H. Kim, J. H. Lee, "Chemical functionalization of graphene and its applications," *Progress in Materials Science*, vol. 57, no. 7, pp. 1061–1105, (2012). doi: 10.1016/j.pmatsci.2012.03.002.

[8] J. Mahmood, E. K. Lee, M. Jung, D. Shin, H.J. Choi, J.M. Seo, S.M. Jung, D. Kim, F. Li, M. S. Lah, N. Park, H.J. Shin, J.H. Oh, J.B. Baek, "Two-dimensional polyaniline (C_3N) from carbonized organic single crystals in solid state," *The Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 113, no. 27, pp. 7414–7419, (2016). doi: 10.1073/pnas.1605318113.

[9] K. Belasfar, M. Houmad, M. Boujnah, A. Benyoussef, A. EL Kenz, “First-principles study of BC3 monolayer as anodes for lithium-ion and sodium-ion batteries applications,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 139, no. December 2019, p. 109319, (2020). doi: 10.1016/j.jpcs.2019.109319.

[10] S. Thomas and S. U. Lee, “Atomistic insights into the anisotropic mechanical properties and role of ripples on the thermal expansion of h-BCN monolayers,” *RSC Advances*, vol. 9, no. 3, pp. 1238–1246, (2019). doi: 10.1039/C8RA08076C.

[11] B. Mortazavi, G. R. Berdiyorov, M. Makaremi, T. Rabczuk, “Mechanical responses of two-dimensional $MoTe_2$; pristine 2H, 1T and 1T′ and 1T′/2H heterostructure,” *Extrem Mechanics Letters*, vol. 20, pp. 65–72, (2018). doi: 10.1016/j.eml.2018.01.005.

[12] D. Ma, J. Zhang, X. Li, C. He, Z. Lu, Z. Lu, Z. Yang, Y. Wang, “C_3N monolayers as promising candidates for NO_2 sensors,” *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 266, no. 2, pp. 664–673, (2018). doi: 10.1016/j.snb.2018.03.159.

[13] Y. Wang, Z. Jiao, S. Ma, Y. Guo, “Probing C3N/Graphene heterostructures as anode materials for Li-ion batteries,” *Journal. Power Sources*, vol. 413, no. December 2018, pp. 117–124, (2019). doi: 10.1016/j.jpowsour.2018.12.031.

[14] M. Makaremi, B. Mortazavi, C. V. Singh, “Adsorption of Metallic, Metalloidic, and Nonmetallic Adatoms on Two-Dimensional C_3N,” *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 121, no. 34, pp. 18575–18583, (2017). doi:10.1021/acs.jpcc.7b04511.

[15] J. Lin and W. Zhou, “6- Defect in 2D materials beyond graphene,” *Defects in Advanced Electronic Materials and Novel Low Dimensional Structures*, vol. 11, pp. 161-187, (2018). doi: 10.1016/B978-0-08-102053-1.00006-5.

[16] N. Liu, R. Pidaparti, X. Wang, “Abnormal linear elasticity in polycrystalline phosphorene,” *Physical. Chemistry. Chemical. Physics*, vol. 20, no. 13, pp. 8668–8675, (2018). doi: 10.1039/c7cp08540k.

[17] L. Fan, Z. Bian, Z. Huang, F. Song, Y. Xia, J. Xu, “New insight into bonding energy and stress distribution of graphene oxide/hexagonal boron nitride: Functional group and grain boundary effect,” *Diamond and Related Materials*, vol. 127, pp. 109185, (2022). doi: 10.1016/j.diamond.2022.109185.

[18] H. Zhang, H, Li, X. Cheng, “The effect of temperature, defect and strain rate on the mechanical property of multi-layer graphene: Coarse-grained molecular dynamics study,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 85, pp. 97-102, (2017). doi.org/10.1016/j.physe.2016.07.003.

[19] A. Dadrasi, A. Albooyeh, S. Fooladpanjeh, A. Salmankhani, A. Hamed Mashhadzadeh, M. R. Saeb, “Theoretical examination of the fracture behavior of BC_3 polycrystalline nanosheets: Effect of crack size and temperature,” *Mechanics of Materials*, vol. 165, pp. 104158, (2022). doi: 10.1016/j.mechmat.2021.104158.

[20] B. Bagher, M. Z. Dehaghani, M. E. Safa, P. Zarrintaj, A. H. M.ashhadzadeh, M. R. Ganjali, “Fracture fingerprint of polycrystalline C3N nanosheets: Theoretical basis,” *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, vol. 106, pp. 107899, (2021). doi: 10.1016/j.jmgm.2021.107899.

[21] F. Molaei, M. Z. Dehaghani, A. Salmankhani, S.Fooladpanjeh, S. M.Sajadi, M. Esmaeili Safa, O. Abida, S.

Habibzadeh, A. H. Mashhadzadeh, M. R. Saeb, “Applying molecular dynamics simulation to take the fracture fingerprint of polycrystalline SiC nanosheets,” *Computational Materials Science*., vol. 200, pp. 110770, (2021). doi: 10.1016/j.commatsci.2021.110770.

[22] M. I. R. Shishir, M. S. R. Elapolu, A. Tabarraei, “Investigation of fracture and mechanical properties of monolayer C_3N using molecular dynamic simulations,” *Mechanics of Materials*, vol. 160, (2021). doi: 10.1016/j.mechmat.2021.103895

[23] A. H. N. Shirazi, R. Abadi, M. Izadifar, N. Alajlan, T. Rabczuk, “Mechanical responses of pristine and defective C_3N nanosheets studied by molecular dynamics simulations,” *Computational Materials Science*., vol. 147, pp. 316–321, (2018). doi: 10.1016/j.commatsci.2018.01.058.

[24] S. A. Adcock and J. A. McCammon, “Molecular dynamics: Survey of methods for simulating the activity of proteins,” *Chemical Reviews*, vol. 106, no. 5, pp. 1589–1615, (2006). doi: 10.1021/cr040426m.

[25] B. S. Lee and S. Park, “Applying Tersoff-potential and bond-softening models in a molecular dynamics study of femtosecond laser processing,” Journal of Applied Physics, vol. 126, no. 4, (2019). doi: 10.1063/1.5096013.

[26] A. Stukowski, “Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool,” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 18, no. 1, (2010). doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.

[27] F. L. Guo, D. Tan, T. Wu, P. Huang, Y. Q. Li, N. Hu, S. Y. Fu, “Experimental characterization and molecular dynamics simulation of thermal stability, mechanical properties and liquid oxygen compatibility of multiple epoxy systems for cryotank applications,” *Extreme Mechanics Letters*, vol. 44, pp. 101227, (2021). doi: 10.1016/j.eml.2021.101227.

[28] B. Bagheri. M. Z. Dehaghani, Z. Karami, A. Salmankhani, Y. Rostamiyan, P. Zarrintaj, A. H. Mashhadzadeh, M. R. Saeb, “Correlation between surface topological defects and fracture mechanism of γ-graphyne-like boron nitride nanosheets,” *Computational Materials Science*., vol. 188, pp. 110152, (2021). doi: 10.1016/j.commatsci.2020.110152.

[29] Z. Ni, H. Bu, M. Zou, H. Yi, K. Bi, Y. Chen, “Anisotropic mechanical properties of graphene sheets from molecular dynamics,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 405, no. 5, pp. 1301–1306, (2010). doi: 10.1016/j.physb.2009.11.071.

[30] B. Wang, Y. Puzyrev, and S. T. Pantelides, “Strain enhanced defect reactivity at grain boundaries in polycrystalline graphene,” *Carbon*, vol. 49, no. 12, pp. 3983–3988, (2011). doi: 10.1016/j.carbon.2011.05.038.

[31] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, A. Albooyeh, A. Salmankhani, A. H. Mashhadzadeh, M. R. Saeb, “A theoretical insight into the fracture behavior of the edge-cracked polycrystalline BC_3 nanosheets,” *Computational Materials Science*, vol. 192, pp. 110345, (2021). doi: https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110345.

[32] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, K. E. Eshkalak, S. Sadeghzadeh, M. R. Saeb, “Crack pathway analysis in graphene-like BC3 nanosheets: Towards a deeper understanding,” *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, vol. 107, pp. 107980, (2021). doi: 10.1016/j.jmgm.2021.107980.

[33] G. H. Lee, R. C. Cooper, S. J. An, S. Lee, A. V. D. Zande, N. Petrone, A. G. Hammerberg, C. Lee, B. Crawford, W. Oliver, J. W. Kysar , J. Hone, "High-strength chemical-vapor-deposited graphene and grain boundaries," *Science*, vol. 340, no. 6136, pp. 1074–1076, (2013). doi: 10.1126/science.1235126.

[34] B. Mortazavi and G. Cuniberti, "Mechanical properties of polycrystalline boron-nitride nanosheets," *RSC Advances*, vol. 4, no. 37, pp. 19137–19143, (2014). doi: 10.1039/c4ra01103a.

[35] B. Mortazavi and G. Cuniberti, "Atomistic modeling of mechanical properties of polycrystalline graphene," *Nanotechnology*, vol. 25, no. 21, (2014). doi: 10.1088/0957-4484/25/21/215704.

[36] Y. Wei, H. Wang, X. Lu, X. Fan, H. Wei, "Tensile mechanical properties of c-BN thin layers under tension: A molecular dynamics simulation," *Computational Materials Science*, vol. 131, pp. 315–320, (2017). doi: 10.1016/j.commatsci.2017.01.046.

[37] H. Bao, Y. Huang, Z. Yang, Y. Sun, Y. Bai, P. K. Chu, K. Xu, F. Ma "Molecular Dynamics Simulation of Nanocrack Propagation in Single-Layer MoS2 Nanosheets," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 122, no. 2, pp. 1351–1360, (2018). doi: 10.1021/acs.jpcc.7b10094.

[38] R. K. Zahedi, A. H. N. Shirazi, P. Alimouri, N. Alajlan, T. Rabczuk, "Mechanical properties of graphene-like BC_3; a molecular dynamics study," *Computational Materials Science*, vol. 168, no. May, pp. 1–10, (2019), *doi: 10.1016/j.commatsci.2019.05.053.*

[39] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, and A. Alavi Gharahbagh, "Interactions between HA/GO/epoxy resin nanocomposites: optimization, modeling and mechanical performance using central composite design and genetic algorithm," *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, vol. 41, no. 2, (2019). doi: 10.1007/s40430-019-1564-7.

[40] A. Dadrasi, A. R. Albooyeh, S. Fooladpanjeh, M. D. Shad, M. Beynaghi, "RSM and ANN modeling of the energy absorption behavior of steel thin-walled columns: a multi-objective optimization using the genetic algorithm," *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, vol. 42, no. 11, (2020). doi: 10.1007/s40430-020-02643-5.